

# Raffinement du modèle

Les objectifs de cette séance sont :

- ▶ Implémentations de conditions aux limites.
- ▶ Configurations différentes du modèle.

## 1 Conditions aux limites

Dans la suite, nous allons utiliser plusieurs types de conditions aux limites, différentes selon les configurations et les bords du domaine :

- ▶ Réflexion : une paroi avec une condition à la limite réflexive implique que la particule rebondit de manière symétrique. Les composantes de la vitesse dans les directions perpendiculaires à la paroi changent de signe.
- ▶ Absorption : les particules disparaissent lorsqu'elles rencontrent la paroi.
- ▶ Périodique : cette condition s'applique par paire de paroi. Une particule qui rencontre un paroi symétrique est transportée, sans modification de trajectoire sur la paroi à l'opposé du domaine.

### Question 1.

Implémenter chacune de ces conditions aux limites.

### Question 2.

Tester chacune de ces conditions aux limites.

## Conditions aux limites réflexives avec potentiel

Pour la condition à la limite réflexive, il est possible de la définir à l'aide d'un potentiel. Ainsi, dans le cas d'un domaine parallélépipédique, la condition réflexive sur le bord bas du domaine s'écrit, pour la particule  $i$  :

$$F_i = -24\varepsilon \frac{1}{2r} \left(\frac{\sigma}{2r}\right)^6 \cdot \left(1 - 2\left(\frac{\sigma}{2r}\right)^6\right)$$

avec  $r$  la distance au mur. Le rayon de coupure est dans ce potentiel  $r_{cut} = 2^{1/6}\sigma$ .

### Question 3.

Implémenter ce potentiel pour les différents bords.

### Question 4.

Comparer les résultats pour les deux implémentations des conditions aux limites réflexives.

## 2 Potentiel gravitationnel

Dans certaines applications, nous avons besoin d'ajouter des potentiels supplémentaires. Dans un premier temps, nous allons ajouter le potentiel gravitationnel.

Le potentiel gravitationnel est un champ uniforme qui s'applique à l'ensemble des particules et qui agit dans la direction verticale. Il intervient comme une force extérieure dans le modèle.

$$\mathbf{F}_i^G = (0, m_i \times G)$$

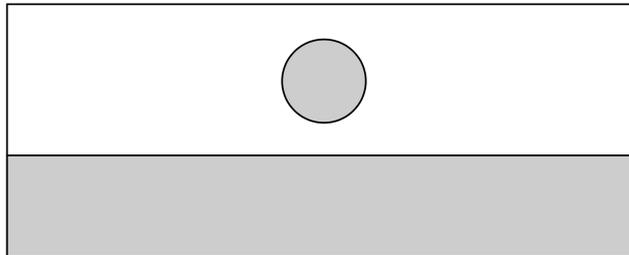
avec  $m_i$  la masse de la particule  $i$  et  $G$  l'intensité du champ gravitationnel.

**Question 5.**

Ajouter le champ gravitationnel dans le modèle.

**3 Application : collision de deux objets**

On souhaite simuler la collision entre deux objets comme sur la figure



Ce qui permettra d'obtenir les résultats de simulation suivant, à l'instant  $t_1$



et en fin de simulation.



Dans notre simulation, on souhaite limiter la divergence de la vitesse. Pour cela, on impose une énergie cinétique cible, c'est à dire que l'on souhaite garder sous contrôle la valeur

$$E_c = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{v}_i^n)^2.$$

Si on choisit d'imposer une énergie cinétique limite au système, la vitesse doit être mise à l'échelle régulièrement avec le coefficient

$$\beta = \sqrt{\frac{E_c^D}{E_c}}.$$

On mettra à jour la vitesse toutes 1000 itérations en le multipliant par le facteur  $\beta$

$$v_i^n = \beta v_i^n.$$

Afin de réaliser cette simulation, on considère les paramètres suivants :

$$\begin{aligned}L_1 &= 250, & L_2 &= 180, \\ \varepsilon &= 1, & \sigma &= 1, \\ m &= 1, & v &= (0, 10), \\ N_1 &= 395, & N_2 &= 17227, \\ r_{cut} &= 2.5\sigma, & \delta t &= 0.00005 \\ G &= -12, & E_c^D &= 0.005\end{aligned}$$

**Question 6.**

Réaliser la simulation jusqu'à  $t = 29.5$ .

## 4 Gestion des erreurs

**Question 7.**

Mettre en place un mécanisme de gestion des erreurs.

**Question 8.**

Évaluer les forces et les faiblesses de ce mécanisme.